

Title	複雑な分子の構造の揺らぎ(生物,階層性と非線形ダイナミクス:現象論の視座)
Author(s)	村上, 洋
Citation	物性研究 (1997), 67(5): 579-580
Issue Date	1997-02-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/95993
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

「複雑な分子の構造の揺らぎ」

理化学研究所、PDC

村上 洋

蛋白質分子や合成高分子など、多数の原子のネットワークから成る複雑な系の構造の揺らぎに興味がある。これらの系の間に共通な構造のダイナミクスの特徴はないものかと思って実験的に調べている。

これらの構造揺らぎを調べる一つの方法は系に導入した色素分子をプローブとして用いることである。色素分子をレーザー光により光励起すると、電子励起状態で色素分子のエネルギーが様々な緩和過程により散逸する（エネルギー緩和）。まず、フェムト秒領域で色素分子及びその回りの振動緩和が起こり、その後、まわりの構造変化に起因する緩和が起こる。蛋白質のような不規則系の場合、様々な時間スケールの構造緩和が存在すると考えられている[1]。エネルギー緩和の間、電子励起状態にある色素分子は蛍光を発する。蛍光スペクトルの時間変化は電子励起状態のエネルギー緩和を反映するから、蛍光スペクトルを調べることでそのエネルギー緩和の様子から色素分子の回りの構造緩和の情報を得ることができる。今回の実験では、採用した色素分子の蛍光寿命は数 ns であり、また、測定装置の時間分解能は数百 ps であるから、およそ数百 ps ～数 ns までの間の緩和過程を調べることができる。

試料は蛋白質ミオグロビンとポリビニルアルコール（PVA）という合成高分子である。ミオグロビンは筋肉の細胞中で酸素を貯蔵する機能を持った蛋白質である。その構造は様々な種類のアミノ酸がつながり（ポリペプチド鎖）、その鎖が複雑に折り畳まれてできており、その中に酸素と結合する活性中心であるヘムという色素分子を持つ。このヘムをプローブ分子として採用する。PVAは簡単な原子団がくりかえされた長い鎖である。PVAの中にはローダミン640という色素を溶かし込む。

簡単に結果を示すと以下の通りである。ミオグロビンでは、ガラス転移温度（～170 K）から室温の間で、時間分解能以内、つまり、数百 ps 以下で終了する構造緩和が存在し、緩和の大きさは温度が上昇すると共に大きくなる[2]。この温度領域で観測の時間スケールに比べ十分速く緩和が終了しているならば、緩和の大きさは温度に依存しないはずである。実験結果を説明するためには、温度に依存した部分的に緩和した状態が存在することが必要であると考えられる。PVAでは、そのガラス転移温度（～360 K）以下の、150 Kから室温まで測定を行い、同様の結果を得た[3]。最近、別の合成高分子において、中性子非弾性散乱測定からガラス転移温度以下でピコ秒領域の構造緩和の存在が示されている[4]。

”階層的に束縛されたダイナミクス”という考え方が、複雑な系の”引き伸ばされた指数型”緩和現象を説明するために最近提案された[5]。これは、系内の様々なサイズの原子のグループの運動は独立ではなく、階層の間に束縛が存在し、そして、ある階層のグループの束縛の解放は幾つかのそれより小さい階層のグループがある配置

をとったときにのみ起こると考える。ミオグロビンは複雑な原子のネットワークでコンパクトに折り畳まれている。一方、PVAはホモポリマーであるから原子のネットワークは単純であるが、その鎖は複雑に絡み合った状態になっている。それ故、このダイナミクスはこれらの構造の揺らぎのための有望なモデルと考えられる。

次に、系がこのダイナミクスに従うならば緩和過程の温度変化はどうなるのかを考えてみる。温度が上昇すると原子のグループの揺らぎは当然大きくなり、そのグループより大きな階層の緩和のための配置が実現され易くなるはずである。逆に、低い温度ではそういう配置をなかなか実現できない。つまり、ある温度ではある階層までの緩和が完了し、それより上位の階層の緩和は観測の時間スケール内に起こらない。そして、温度が上昇しある温度に達すると次の階層の緩和が起こる。これは温度に依存した部分的な緩和に対応すると考えられる。それぞれの温度で緩和が時間分解能以内に起こるならば、実験結果は良く説明できる。

今回の結果は、これらの試料だけでなく、複雑な系固有の構造の揺らぎの特徴を示すものと考えている。

参考文献

- [1] F. Parak and H. Frauenfelder, *Physica A* 201 (1993) 332.
- [2] H. Murakami and T. Kushida, *J. Lumin.* 58 (1994) 172; *Phys. Rev. B* 54 (1996) 978.
- [3] H. Murakami and T. Kushida, *J. Lumin.* (印刷中)
- [4] U. Buchenau, C. Schonfeld, D. Richter, T. Kanaya, K. Kaji, and R. Wehrmann, *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 2344.
- [5] R. G. Palmer, D. L. Stein, E. Abrahams, and P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984) 958.